

# ПЕРЕЗАРЯДКА АТОМІВ ВОДНЮ НА ЯДРАХ БАГАТОЗАРЯДНИХ ІОНІВ

Ю.Ю. Машіка

Ужгородський національний університет, кафедра теоретичної фізики, 88000, Ужгород, вул. Волошина, 32

Розраховано перерізи перезарядки  $\sigma$  атома водню на ядрах багатозарядних іонів з врахуванням виродження кінцевих станів іона. Врахування переходів між цими станами, які викликані обертанням між'ядерної вісі, приводить до якісних змін залежності перерізу від швидкості зіткнення. Приведені конкретні розрахунки для іона  $C^{6+}$ .

## 1. Вступ

Розрахунок перерізів перезарядки атома водню на багатозарядних іонах становить значний інтерес як з прикладної, так і з методичної точок зору. Прикладне значення цієї задачі обумовлено її зв'язком з проблемами нагрівання та діагностики високотемпературної плазми. Водночас перезарядка водню на ядрах представляє найпростіший приклад процесу з перерозподілом за участю великої кількості вироджених станів, що становить загальнофізичний інтерес.

Особливість перезарядки за участю водневоподібних систем зумовлена наявністю додаткової симетрії, пов'язаною з можливістю відокремлення змінних в рівнянні Шредінгера задачі двох кулонівських центрів  $Z_1 e Z_2$  у витягнутих сферіодальних координатах. Одним з наслідків такої додаткової симетрії одноелектронної системи  $peZ$  є та обставина, що із

всіх  $n^2$  вироджених станів іона ( $Ze$ ), які належать рівню з головним квантовим числом  $n$ , при перезарядці з вихідного терму заселяється лише один стан [1]. Цей стан відповідає максимальній проекції дипольного моменту водневоподібного рівня іона на напрямок електричного поля  $\vec{F}$ , створюваного протоном, і відповідно характеризується параболічними квантовими числами  $n_2 = n - 1$ ,  $n_1 = 0, m = 0$ . У подальшому ми будемо позначати цей стан індексом  $\psi_0$ .

Відмічені особливості приводять до появи нового ефекту, суть якого зводиться до наступного. Повна ймовірність переходу складається з переходів у двох точках – при зближенні ( $R_k$ ) та при розлітанні ( $R_{k+1}$ ), див рис.1.

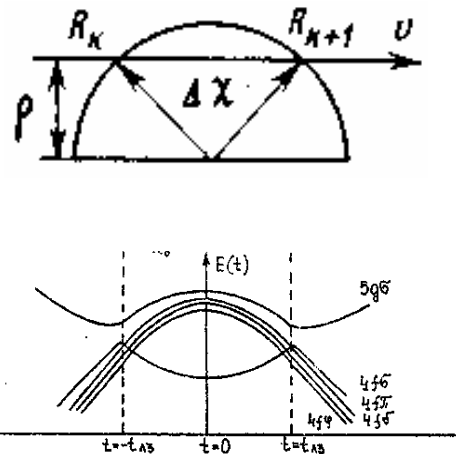


Рис.1. Геометрія зіткнення та схема термів системи, яка перезаряджається.

Тоді при русі системи від точки  $R_k$  до точки  $R_{k+1}$  можливі переходи між заселеним станом  $\psi_0$  та іншими  $n^2 - 1$  виродженими станами, що може привести, зокрема, до спустошення стану  $\psi_0$  при підході до точки  $R_{k+1}$ . Цим самим повна ймовірність переходу визначається не тільки заселенням стану  $\psi_0$  в точках  $R_k$  і  $R_{k+1}$ , але й характером взаємодії  $n^2$  ви-

роджених станів між цими точками. Вивченню ефектів такого типу і присвячена дана праця.

## 2. Фізичні картина процесу перезарядки в рамках моделі динамічних термів

Основні особливості процесу перезарядки полягають у наступному. Початковий терм  $E_0(R)$  квазімолекули  $H(1S) + X^{Z+}$  при великих міжядерних відстанях ( $R \rightarrow \infty$ ) співпадає з основним рівнем атома водню і при подальшому зближенні повільно змінюється внаслідок слабкої поляризаційної взаємодії ( $\approx 1/R^4$ ). Кінцевий терм  $E_n(R)$  квазімолекули  $H^+ + X^{(Z-1)+}$  при  $R \rightarrow \infty$  збігається з рівнем багатозарядного іона  $X^{(Z-1)+}$  з енергією  $E_n = -Z^2/2n^2$  і при скінчених  $R$  включає сильну кулонівську взаємодію між протоном та багатозарядним іоном  $X^{(Z-1)+}$ , так що:

$$E_n(R) = -Z^2/2n^2 + (Z-1)/R. \quad (1)$$

Легко бачити, що вихідний терм має систему точок перетину  $R_n$  з водневоподібною системою рівнів кінцевого терму. Ці точки даються співвідношенням

$$R_n = 2(Z-1)n^2/(Z^2 - n^2), \quad n < Z. \quad (2)$$

При малих відносних швидкостях ядер ( $v < 1$ ) ці точки перетину дають основний внесок у ймовірність перезарядки.

Співвідношення (2) дозволяє оцінити значення головного квантового числа  $n_e$  рівнів, на котрі здійснюється перехід електрона (перезарядка):

$$n_e = Z/[1 + 2(Z-1)/R_e]^{1/2}. \quad (3)$$

В праці [2] було показано, що ефективна відстань  $R_e$ , яка дає основний внесок в

перезарядку, пропорційна  $\approx Z^{1/2}$ , а тому  $n_e \approx Z^{3/4}$ .

Розрахунок перерізів перезарядки у різні  $n, l$ -стани проілюструємо на прикладі системи  $C^{6+} + H$  при швидкостях зіткнення  $v = 1 - 20 \cdot 10^7$  см/с. Проведені згідно формули (3) оцінки показують, що основний вклад в переріз перезарядки дає рівень з  $n = 4$ . Вклад решти рівнів становить менше 10%.

Початковим заселеним станом в даній системі є  $6h\sigma$ . Дуже вузький квазіперетин термів  $6h\sigma$  і  $5g\sigma$ , проходиться системою діабатично. Терм  $5g\sigma$  має також точку квазіперетину, яка зв'язує терми  $5g\sigma$  і  $4f\sigma$  та знаходиться на відстані  $R = 8$  а.е. (див. рис.1). Ймовірність непружного проходження квазіперетину цих термів визначається формулою Ландау-Зінера

$$P = \exp\left(-\frac{2\Delta}{v}\right), \quad (4)$$

де  $v$  - швидкість зіткнення. Для розрахунку параметра Мессі  $\Delta$  скористаємося добре відомою апроксимацією [3]:

$$\Delta = \pi(\Delta E)^2 / 4\Delta F \quad (5)$$

де  $\Delta F = |F_2 - F_1| = (Z-1)/R_c^2$  - різниця нахилів відповідних діабатичних термів у точці квазіперетину  $R_c$ . Для розрахунку величини обмінного розщеплення термів  $\Delta E(R_c)$  скористаємося отриманою в нашій попередній праці [4] асимптотичною формулою:

$$\Delta E(R_c) = \left\{ \frac{Z_1^2}{n^3} \left[ 1 + \frac{Z_1^2(Z_2 - Z_1)}{n^3(-2E_c)^{3/2}} \right]^{-1/2} + \frac{Z_2^2}{(n')^3} \left[ 1 - \frac{Z_2^2(Z_2 - Z_1)}{(n')^3(-2E_c)^{3/2}} \right]^{-1/2} \right\} \delta_c, \quad (6)$$

де

$$\delta_c = (4p)^x \left[ 2\pi \Gamma\left(\chi + \frac{(1+m)}{2}\right) \Gamma\left(\chi + \frac{(1-m)}{2}\right) \right]^{-1/2} \exp\left\{-[2(1-\beta)^{1/2} + \right.$$

$$+ 2\beta \ln \frac{\beta^{1/2}}{1+(1-\beta)^{1/2}} \Big] p + \chi \ln \frac{4(1-\beta)^{3/2}}{\beta} \Big\} \left[ 1 + O\left(\frac{1}{p}\right) \right], \quad (7)$$

$\chi = n_2 + (m+1)/2$  для  $eZ_1$ - термів,  
 $\chi' = n_2' + (m+1)/2$  для  $eZ_2$ - термів,  
 $n = n_1 + n_2 + m + 1$ ,  $n' = n_1' + n_2' + m + 1$ .

Область квазіперетину система в процесі зіткнення проходить двічі – при зближенні та розлітанні частинок. Крім того, при розрахунках заселеності станів з  $n=4$  необхідно враховувати, що між двома проходженнями області квазіперетину, внаслідок повороту між'ядерної вісі, відбувається перемішування станів у мультиполі ( $5g\sigma, 4f\pi, 4f\sigma, 4f\phi$ ) та обертові переходи в точці повороту між станами мультиполя в границі об'єднаного атома.

Задачу про перемішування станів мультиполя при великих між'ядерних відстанях, як було показано в роботі [5], можливо звести до інтерференційних ефектів шляхом введення динамічних станів:

$$\psi_{n'n''} = \sum_{i_1 i_2} D_{n' i_1}^j(\beta) D_{n'' i_2}^j(\pi - \beta) \psi_{i_1 i_2}, \quad (8)$$

які визначаються матрицями повороту Вігнера  $D_{ni}^j(\beta)$  [6], параметрично залежними від швидкості  $v$ ; тут  $tg\beta = 3Z\rho v / 3n$ ,  $j = (n-1)/2$ ,  $Z$  – заряд падаючого іона,  $\rho$  – прицільний параметр,  $i_1, i_2$  – набір параболічних квантових чисел,  $n$  – головне квантове число.

Процес перемішування станів мультиполя аналогічний процесу резонанс-

ної перезарядки. Зменшення заселеності початкового адіабатичного стану ( в нашому випадку -  $5g\sigma$  ) внаслідок цього перемішування станів мультиполя було розглянуто в роботі [2]:

$$\lambda_n = 1 - \left[ 1 - \sin^2 \alpha \cdot \sin^2 \beta \right]^{1/2}, \quad (9)$$

де  $\lambda_n$  - ймовірність розпаду початкового

стану,  $\alpha = \frac{\Delta X}{2} \left[ 1 + \left( \frac{3n}{2Z\rho v} \right)^2 \right]^{1/2}$ , а  $\Delta X$  - кут

повороту між'ядерної вісі. Цей вираз застосовний в області, де виправдано використання асимптотичного розкладу (6) для величини обмінного розщеплення термів  $\Delta E$ . Межа цієї області в нашому випадку розташована на між'ядерній відстані  $R \approx 6$  а.е.

Ймовірність обертових переходів в точці повороту між станами мультиполя можна визначити, використовуючи результати праці [7]:

$$j_{ik}^n = \frac{1}{\sin^2(\pi/2n)} \exp\left(-\frac{2}{v} \int_0^R \Delta E_{ik}(R) dR\right) \quad (10)$$

де  $\Delta E_{ik}(R)$  - розщеплення термів мультиполя. Звідси ймовірність розпаду початкового стану буде визначатися формулою

$$j_i^n = \sum_{k \neq i} j_{ik}^n.$$

Остаточно ймовірність заселення стану з  $n = 4$  рівна

$$Q_{n=4} = 2p(1-p) + (1-p)^2 \lambda_4 - p(1-p)(1-\lambda_4) j_g^5 + p^2 j_f^4. \quad (11)$$

### 3. Результати числових розрахунків.

#### Обговорення

Особливий інтерес для практичних застосувань [2] становить розрахунок заселення станів іона з різними  $l$ . Терми системи  $rez$  при  $R \rightarrow \infty$  нумеруються параболічними квантовими числами. Тому розподіл по  $l$  буде визначатися із пе-

рерозкладу параболічних станів  $[nn_1n_2m]$  мультиплету по сферичним:

$$w_{nl} = \sum_{m=0}^l \sum_{\mu_1 + \mu_2 = m} \langle lm / \mu_1 \mu_2 \rangle \xi_{\mu_1 \mu_2}^2, \quad (12)$$

де  $\langle lm / \mu_1 \mu_2 \rangle$  - коефіцієнти Клебша-Гордана,

$$\mu_1 = \frac{1}{2}(m + n_1 - n_2), \quad \mu_2 = m - n_2 - n_1,$$

$\xi_{\mu_1\mu_2}$  - доля заселення станів  $[\mu_1\mu_2m]$ . Коefіцієнти Клебша-Гордана для різних значень  $l$  наведені в [3]. Результати розрахунків  $w_{nl}$  представлені на рис.2. На цьому ж рисунку наведено результати розрахунків методом сильного зв'язку каналів [8]. Із малюнку видно добре узгодження з результатами точного чисельного розрахунку.

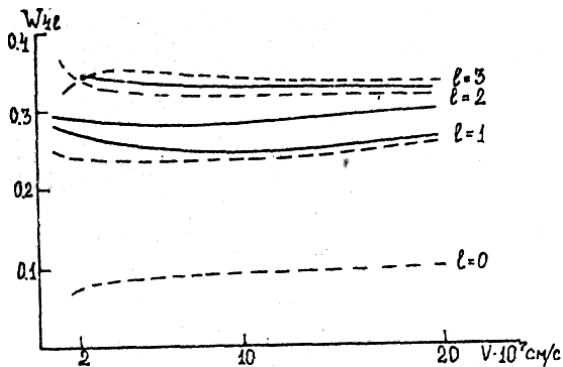


Рис. 2. Залежність ймовірності  $w_{nl}$  заселення різних станів від швидкості зіткнення  $v$  для реакції  $C^{6+} + H \rightarrow C^{5+} + H^+$ . Суцільні лінії – результати даної роботи, пунктирні – результати праці [8].

На рис.3. подано залежність перерізу перезарядки  $\sigma_n$  у стан з  $n=4$  від швидкості зіткнення, яка отримана нами інтегруванням  $Q_4$  за прицільними параметрами у наближенні прямолінійного прольоту ( $R^2 = \rho^2 + v^2 t^2$ ). На цьому ж рисунку наведені результати чисельних

розрахунків методом сильного зв'язку каналів [8] та експериментальні дані групи Афросімова [9].

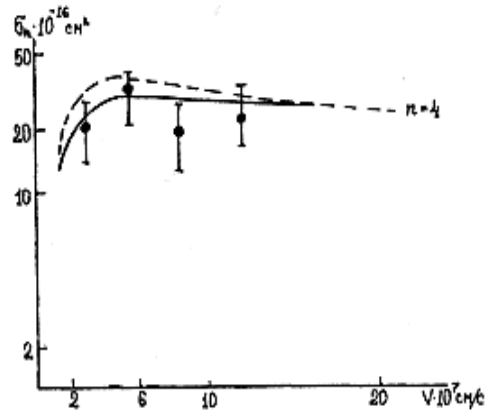


Рис. 3. Залежність перерізу перезарядки  $\sigma_n$  від швидкості зіткнення для реакції  $C^{6+} + H(1s) \rightarrow C^{5+} + H^+$ . Суцільна лінія – результат даної роботи, пунктирна лінія – результат роботи [8], точки – експериментальні дані роботи [9].

Добра узгодженість з експериментальними даними та результатами розрахунків методом сильного зв'язку каналів свідчить про надійність розрахунків перерізів перезарядки з використанням одержаних в наших попередніх працях [4,10] асимптотичних формул (типу (6)) для розщеплення термів  $\Delta E$ .

### Література:

1. Комаров И.В., Пономарев Л.И., Славянов С.Ю. Сфероидальные и кулоновские сфероидальные функции. М.: Наука, 1976, 319с.
2. Абрамов В.А., Барышников Ф.Ф., Лисица В.С. ЖЭТФ, 1978, 74, с. 897-910.
3. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Квантовая механика. М.: Наука, 1974, 752с.
4. Лазур В.Ю., Машика Ю.Ю. УФЖ, 1990, 35, с.1457-1463.
5. Демков Ю.Н., Островский В.Н., Соловьев Е.А. ЖЭТФ, 1974, 66, с. 125
6. Берестецкий В.Б., Лифшиц Е.М., Питаевский Л.П. Релятивистская квантовая теория, ч.1, «Наука», 1968,
7. Соловьев Е.А. ТМФ, 1976, 28, с. 115
8. Green T.A., Shipsey E.J., Browne J.C. Phys. Rev. A., 1982, 28, p.1364
9. Афросимов В.В., Донец Е.Д., Зиновьев А.Н., и др. Письма в ЖЭТФ, 1983, 38, с.70
10. Лазур В.Ю., Машика Ю.Ю., Янев Р.К., Грозданов Т.П. ТМФ. 1991. 87, № 1. с.97-109.

# **CHARGE EXCHANGE OF HYDROGEN ATOMS ON NUCLEI OF MULTICHARGED IONS**

**V.Yu. Lazur, Yu.Yu. Mashika, I.M.Shvab.**

Department of Theoretical Physics, Uzhgorod National University 88000, Uzhgorod, st.  
Voloshina, 32

The charge exchange cross section  $\sigma$  for hydrogen atoms on nuclei of multi-charged ions are calculated by taking into account degeneracy of the final ion states. Allowance for transitions between the states caused by rotation of the internuclear axis leads to a qualitative change in the dependence of cross section of velocity collision. Concrete calculation are carried out for  $C^{6+}$ .